

стеклования T_g и кристаллизации T_c составляла ± 1 К. Выделение газа при нагревании конденсата регистрировалось ионизационным датчиком давления. Состав двухкомпонентного конденсата определялся после его извлечения из вакуумной камеры. Погрешность определения концентрации газа в конденсате водно-газовой смеси не превышала 3 %.

Данный метод был оптимизирован путём охлаждения молекулярного пучка. Для этого использовано сопло Лавалья, в котором происходит охлаждение потока при адиабатическом расширении. Проведенные пробные эксперименты показали возможность применения данного способа для повышения производительности экспериментальной установки. Теоретически это позволит увеличить долю газа в гидрате без образования кристаллического конденсата и увеличить толщину осаждаемых образцов.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 15-08-02734-а, № 14-08-31007 мол_а) и Программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 15-1-2-7).

1. Патент № 2457010 Российская Федерация, 2010146944/05. Способ получения газовых гидратов, Коверда В.П., Решетников А.В., Файзуллин М.З., Бюл. № 21, (заявл. 17.11.10; опубл. 27.07.12).
2. Sloan E.D., Nature London, 426, P. 353–359, (2003).
3. Dontsov V.E., Chernov A.A., Int. J. Heat Mass Transfer, V.52, P.4919–4928, (2009).

ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В НИЗКОРАЗМЕРНОЙ СИСТЕМЕ $Ba_3Cu_3Sc_4O_{12}$

Бадртдинов. Д.И.*, Мазуренко В.В.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: reason2205@ya.ru

INVESTIGATION OF MAGNETIC INTERACTIONS ON LOW- DIMENSIONAL SYSTEM $Ba_3Cu_3Sc_4O_{12}$

Badrtdinov D.I.*, Mazurenko V.V.

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

This study is devoted to the investigation of magnetic properties of low-dimensional system $Ba_3Cu_3Sc_4O_{12}$. It consists orthogonal CuO_4 plaquettes along c axis. The system has non-trivial magnetic structure according to experiments. In this work the isotropic and anisotropic exchange interactions between magnetic moments were calculated.

Низкоразмерные системы имеют такую особенность, что в них могут реализовываться достаточно нетривиальные магнитные конфигурации, влияющие на их макроскопические свойства. Таким является соединение $Ba_3Cu_3Sc_4O_{12}$, которую можно представить как цепочку ортогональных плакеток CuO_4 (рис.1 сле-

ва). Экспериментально положительное значение температуры Кюри-Вейсса 65K [1] указывает на доминирующее влияние на магнитную конфигурацию ферромагнитных обменных взаимодействий при высоких температурах. Однако, при уменьшении температуры вид кривой восприимчивости отклоняется от закона Кюри-Вейсса, что говорит о возрастании антиферромагнитных корреляций и установлении дальнего антиферромагнитного порядка [2]. Задача микроскопического объяснения этих экспериментальных данных может быть решена при помощи первопринципных методов.

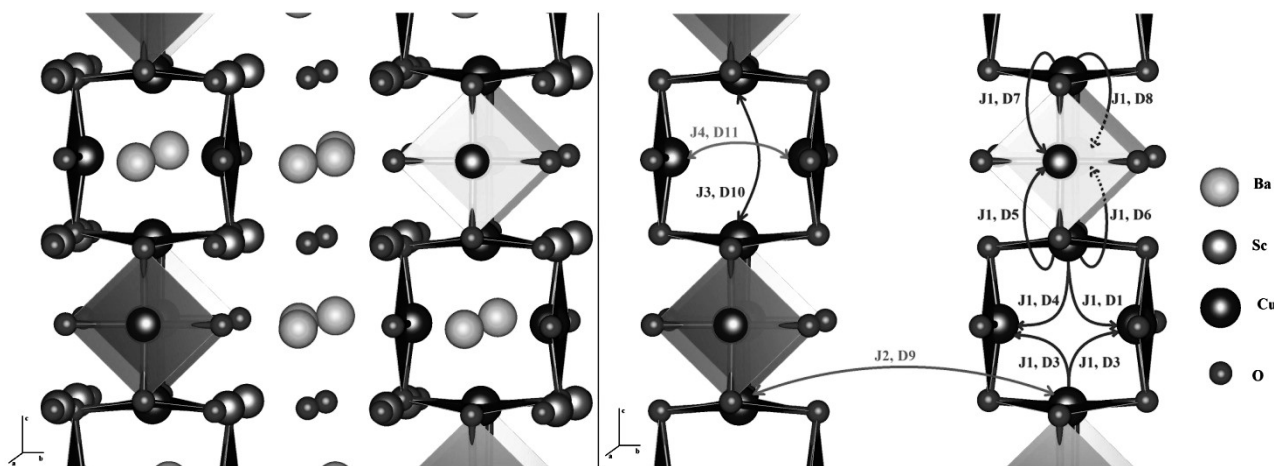


Рис.1. Слева - кристаллическая структура $\text{Ba}_3\text{Cu}_3\text{Sc}_4\text{O}_{12}$. Справа - схематичное изображение плакеток CuO_4 и основных обменных взаимодействий между атомами меди

В рамках данной работы был выполнен расчет электронной структуры системы, в результате которого было определено, что на уровне Ферми энергетические зоны формируются за счет dx^2-y^2 состояний меди и $2p$ состояний кислорода. С использованием процедуру проектирования получены значения интегралов перескока в базисе функций Ванье. По теории возмущения [3] были оценены анизотропные и изотропные обменные взаимодействия между магнитными моментами (рис. 1 справа). Исходя из результатов анизотропное обменное взаимодействие между ближайшими атомами меди по абсолютной величине больше изотропного, что является следствием того, что ферромагнитное изотропное обменное взаимодействие $J1$ реализуется через 90- градусную связь с поляризацией кислородных состояний. Это приводит к подавлению кинетического вклада в обменном взаимодействии. Остальные магнитные взаимодействия $J2$ - $J4$ антиферромагнитны.

Следующим этапом исследования станет определение магнитного порядка в системе через решение магнитной модели с использованием полученных параметров обменных взаимодействий.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 14-12-00306

1. B. Koteswararao, I. Dasgupta, et al., J. Phys.: Condens. Matter 24, 236001 (2012).
2. O.S. Volkova, I.S. Maslova, R. Klingeler, Phys.Rev. B 85, 104420 (2012).
3. T. Moriya, Phys. Rev. 120, 1 (1960).